

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА В ДЕКАРТОВОЙ СИСТЕМЕ КООРДИНАТ

А.А. Дегтярев, А.Е. Деркач
Самарский государственный аэрокосмический университет

Аннотация

Для решения уравнения Шредингера, описывающего распространение электромагнитной волны в нелинейной среде, строится разностная схема типа Писмена-Рекфорда с итерационным уточнением, имеющая квадратичный порядок точности по всем трем пространственным переменным. Для исследования схемы рассмотрены частные случаи задачи, допускающие аналитическое решение. Проведено сопоставление аналитического и численного решений. Приведены результаты численного моделирования процесса распространения электромагнитной волны в нелинейной среде, позволяющие наблюдать как явление самофокусировки светового пучка, так и его самодефокусировки, что полностью согласуется с теорией электромагнитных волн [1].

Отмечается возможность применения разностной схемы для исследования процессов распространения электромагнитной волны в средах с пространственно-зависимым показателем преломления.

Введение

Как известно [1], нелинейное уравнение Шредингера является частным случаем волнового уравнения в параболическом приближении, записанном с учетом эффекта самовоздействия. Эффект самовоздействия проявляется при распространении оптического излучения в средах с кубичной нелинейностью (поляризация пропорциональна напряженности электрического поля в третьей степени).

С учетом этого эффекта уравнение Шредингера в декартовой системе координат запишем как [1]

$$\frac{\partial U}{\partial z} + \frac{i}{2kn_0} \Lambda_D U + \frac{ikn_{nl}^2}{2n_0} |U|^2 U = 0, \quad (1)$$

$$-\frac{L_x}{2} \leq x \leq \frac{L_x}{2}, \quad -\frac{L_y}{2} \leq y \leq \frac{L_y}{2}, \quad 0 \leq z \leq L,$$

где $\Lambda_D \equiv \Lambda_x + \Lambda_y \equiv \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right)$ - оператор Лапласа

в декартовой системе координат,

U - напряженность электрического поля,

k - волновой вектор,

n_0 - показатель преломления среды,

n_{nl} - изменение показателя преломления под действием поля распространяющейся волны.

Отметим, что ось Z совпадает с направлением распространения волны, а оси X и Y лежат в плоскости, перпендикулярной оси Z .

Для получения замкнутой краевой задачи дополним уравнение (1) следующими краевыми условиями

$$\begin{cases} U|_{z=0} = \phi(x, y) \\ U|_{x=-L_x/2} = 0 \\ U|_{x=L_x/2} = 0 \\ U|_{y=-L_y/2} = 0 \\ U|_{y=L_y/2} = 0 \end{cases} \quad (2)$$

Функция $\phi(r)$ описывает напряженность электрического поля волны на входе в среду (волновод), а нулевые граничные условия показывают, что среда (волновод) ограничена проводящей оболочкой.

Без учета нелинейных эффектов уравнение Шредингера принимает вид

$$\frac{\partial U}{\partial z} + \frac{i}{2kn_0} \Lambda_D U = 0 \quad (3)$$

В дальнейшем уравнение (1) будем называть нелинейным уравнением Шредингера, а уравнение (3) - линейным уравнением.

1. Расчетная конечно-разностная схема с итерационным уточнением

Для численного решения системы (1) - (2) построим разностную схему Писмена-Рэкфорда [2]. Определим сетку

$$z_k = k \cdot h_z, \quad k = \overline{0, K}, \quad h_z = L / K$$

$$x_i = i \cdot h_x, \quad i = \overline{-I/2, I/2}, \quad h_x = L_x / I$$

$$y_j = j \cdot h_y, \quad j = \overline{-J/2, J/2}, \quad h_y = L_y / J$$

h_z, h_x, h_y - шаги дискретизации по переменным z, x и y .

Обозначим через U_{ij}^k сеточный аналог численного решения $U(x_i, y_j, z_k)$.

Оператор Лапласа аппроксимируем следующим разностным оператором [2]:

$$\Lambda_x^{h_x} U_{ij}^k = \frac{U_{i-1j}^k - 2U_{ij}^k + U_{i+1j}^k}{h_x^2}.$$

Задаче (1)-(2) поставим в соответствие следующую двухслойную нелинейную разностную схему:

$$\begin{cases} \frac{U_{ij}^{k+1/2} - U_{ij}^k}{0,5h_z} + \frac{i}{2kn_0} \left(\Lambda_x^{h_x} U_{ij}^{k+1/2} + \Lambda_y^{h_y} U_{ij}^k \right) + \\ \quad + \frac{ikn_{nl}^2}{2n_0} |U_{ij}^{k+1/2}|^2 U_{ij}^{k+1/2} = 0 \\ \frac{U_{ij}^{k+1} - U_{ij}^{k+1/2}}{0,5h_z} + \frac{i}{2kn_0} \left(\Lambda_x^{h_x} U_{ij}^{k+1/2} + \Lambda_y^{h_y} U_{ij}^{k+1} \right) + \\ \quad + \frac{ikn_{nl}^2}{2n_0} |U_{ij}^{k+1/2}|^2 U_{ij}^{k+1/2} = 0 \\ U_{ij}^0 = \phi(r) \\ U_{-I/2,j}^k = U_{I/2,j}^k = U_{i,-J/2}^k = U_{i,J/2}^k = 0 \end{cases} \quad (4)$$

Первое уравнение системы разностных уравнений (4) является нелинейным. Для нахождения неизвестной функции $U_{ij}^{k+1/2}$ можно использовать итерационный метод последовательных приближений в сочетании с разностной прогонкой по x и y :

$$\frac{U_{ij}^{s+1k+1/2} - U_{ij}^k}{0,5h_z} + \frac{i}{2kn_0} \left(\Lambda_x^{h_x} U_{ij}^{s+1k+1/2} + \Lambda_y^{h_y} U_{ij}^k \right) + \frac{ikn_{nl}^2}{2n_0} \left| U_{ij}^{s+1k+1/2} \right|^2 U_{ij}^{s+1k+1/2} = 0, \quad (5)$$

причем $U_{ij}^{0k+1/2} = U_{ij}^k$.

Таким образом, система (4) примет вид:

$$\begin{cases} \frac{U_{ij}^{s+1k+1/2} - U_{ij}^k}{0,5h_z} + \frac{i}{2kn_0} \left(\Lambda_x^{h_x} U_{ij}^{s+1k+1/2} + \Lambda_y^{h_y} U_{ij}^k \right) + \frac{ikn_{nl}^2}{2n_0} \left| U_{ij}^{s+1k+1/2} \right|^2 U_{ij}^{s+1k+1/2} = 0 \\ \frac{U_{ij}^{k+1} - U_{ij}^{k+1/2}}{0,5h_z} + \frac{i}{2kn_0} \left(\Lambda_x^{h_x} U_{ij}^{k+1/2} + \Lambda_y^{h_y} U_{ij}^{k+1} \right) + \frac{ikn_{nl}^2}{2n_0} \left| U_{ij}^{k+1/2} \right|^2 U_{ij}^{k+1/2} = 0 \\ U_{ij}^0 = \phi(r), \quad U_{ij}^{0k+1/2} = U_{ij}^k \\ U_{-1/2j}^k = U_{1/2j}^k = U_{i-J/2}^k = U_{iJ/2}^k = 0 \end{cases} \quad (6)$$

В ходе теоретических исследований удалось доказать, что схема (6) имеет порядок аппроксимации $O(h_x^2, h_y^2, h_z^2)$.

В результате проведения вычислительных экспериментов получено подтверждение сходимости разностной схемы (6). Процесс итерационного уточнения обнаружил быструю сходимость: для уточнения решения до величин порядка 10^{-4} требуются 2-3 итерации.

2. Вычислительные эксперименты для среды с постоянным показателем преломления

Рассмотрим сначала аналитическое решение линейного уравнения.

Будем решать линейное уравнение методом разделения переменных. В этом случае одно из частных решений задачи (1)–(2) запишется в виде

$$U(x, y, z) = \exp \left(i \left(\frac{\pi^2}{L_x^2} + \frac{\pi^2}{L_y^2} \right) \alpha z \right) \sin \left(\frac{\pi x}{L_x} \right) \sin \left(\frac{\pi y}{L_y} \right),$$

$$\text{где } \alpha = \frac{1}{2kn_0}, \quad (7)$$

а начальное условие

$$\phi(x, y) = \sin \left(\frac{\pi x}{L_x} \right) \sin \left(\frac{\pi y}{L_y} \right)$$

2.1. Результаты экспериментальных исследований линейного уравнения

Пучок, описываемый формулой (7), является стационарным, так как $|U(x, y, z)|^2 = |U(x, y, 0)|^2$, то есть распределение интенсивности в плоскости OXY не зависит от расстояния z . Это распределение изображено на рис. 1.

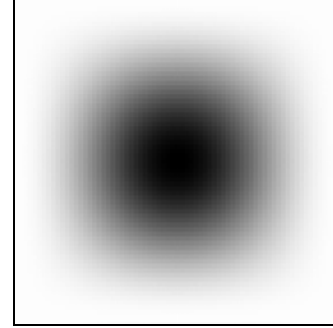


Рис. 1. Распределение интенсивности волны в линейной среде.

На рис. 2-4 приведены результаты численного решения линейного уравнения Шредингера на различных расстояниях от входа в среду.¹

Для проведения численных расчетов были использованы следующие значения параметров:

$$\begin{aligned} L_x = L_y = 50 \text{ мкм}; \\ \lambda = 0,63 \text{ мкм}, \text{ причем } \lambda = 2\pi/k; \\ n_0 = 1. \end{aligned}$$

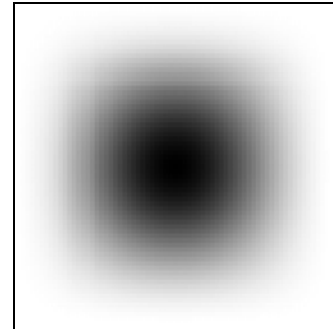


Рис. 2. Распределение интенсивности волны на расстоянии L от входа в среду ($L = 100$ мкм, $n_z = 1000$, $n_x = 70$, $n_y = 70$).

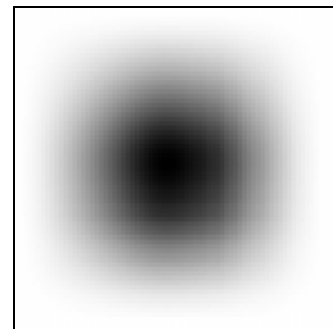


Рис. 3. Распределение интенсивности волны на расстоянии L от входа в среду ($L = 500$ мкм, $n_z = 5000$, $n_x = 70$, $n_y = 70$).

¹ В дальнейшем использованы следующие обозначения: n_x, n_y, n_z - количество интервалов разбиений по осям x, y и z соответственно.

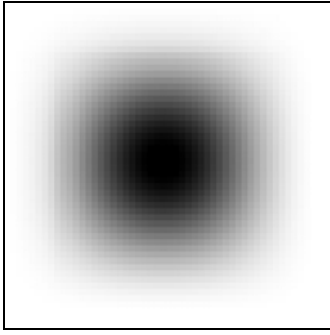


Рис. 4. Распределение интенсивности волны на расстоянии L от входа в среду ($L = 1$ мм, $n_z = 5000$, $n_x = 70$, $n_y = 70$).

Из приведенных рисунков видно, что на расстояниях порядка миллиметра распределения интенсивности волны, полученные с помощью численного решения уравнения Шредингера практически совпадают с аналитически рассчитанным распределением. Среднеквадратическая ошибка при этом не превышает 5%.

3.2. Численное решение нелинейного уравнения Шредингера

Самофокусировка пучка

На рис. 5-7 приведены результаты численного решения нелинейного уравнения Шредингера следующими параметрами:

$$\begin{aligned} L_x = L_y &= 50 \text{ мкм}; \\ \lambda &= 0,63 \text{ мкм, причем } \lambda = 2\pi/k; \\ n_0 &= 1; \\ n_{\text{нл}}^2 &= 0,001, \text{ причем } n_{\text{нл}} > 0. \end{aligned}$$

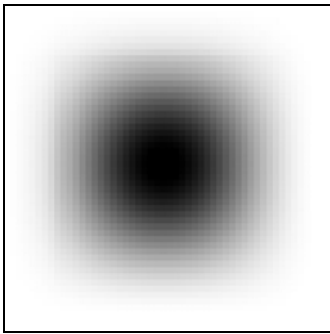


Рис. 5. Распределение интенсивности волны на расстоянии L от входа в среду ($L = 100$ мкм, $n_z = 1000$, $n_x = 50$, $n_y = 50$).

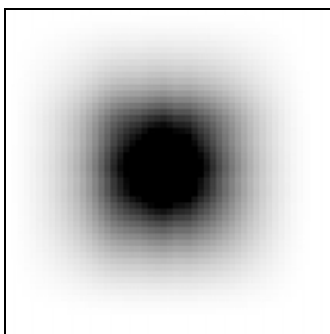


Рис. 6. Распределение интенсивности волны на расстоянии L от входа в среду ($L = 300$ мкм, $n_z = 5000$, $n_x = 50$, $n_y = 50$).

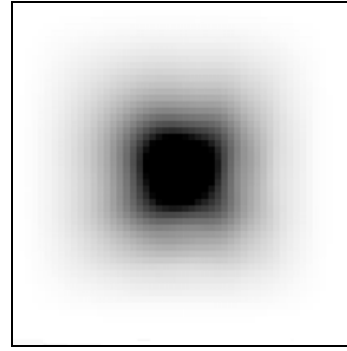


Рис. 7. Распределение интенсивности волны на расстоянии L от входа в среду ($L = 500$ мкм, $n_z = 10000$, $n_x = 50$, $n_y = 50$).

В работе [1] показано, что при $n_{\text{нл}} > 0$ происходит фокусировка пучка, то есть смещение энергии пучка к центру. Это явление можно наблюдать и на рисунках 5-7.

Самодефокусировка пучка

На рис. 8-11 приведены результаты численного решения нелинейного уравнения Шредингера со следующими параметрами:

$$\begin{aligned} L_x = L_y &= 50 \text{ мкм}; \\ \lambda &= 0,63 \text{ мкм, причем } \lambda = 2\pi/k; \\ n_0 &= 1; \\ n_{\text{нл}}^2 &= 0,001, \text{ причем } n_{\text{нл}} < 0. \end{aligned}$$

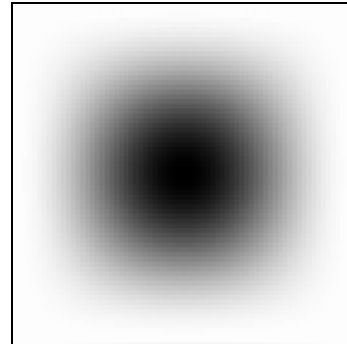


Рис. 8. Распределение интенсивности волны на расстоянии L от входа в среду ($L = 200$ мкм, $n_z = 1000$, $n_x = 50$, $n_y = 50$).

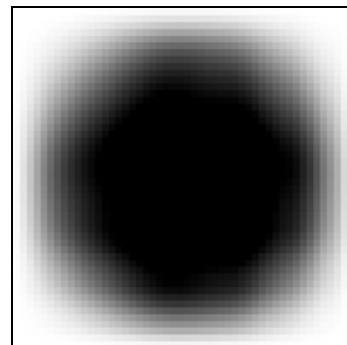


Рис. 9. Распределение интенсивности волны на расстоянии L от входа в среду ($L = 500$ мкм, $n_z = 1000$, $n_x = 50$, $n_y = 50$).

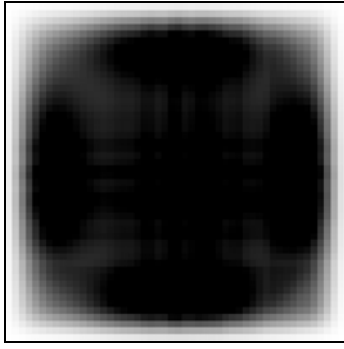


Рис. 10. Распределение интенсивности волны на расстоянии L от входа в среду ($L = 800$ мкм, $nz = 1000$, $nx = 50$, $ny = 50$).

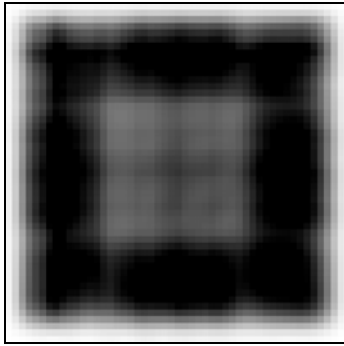


Рис. 11. Распределение интенсивности волны на расстоянии L от входа в среду ($L = 1000$ мкм, $nz = 1000$, $nx = 50$, $ny = 50$).

В работе [1] показано, что при $n_{nl} < 0$ происходит самодефокусировка пучка в нелинейной среде, то есть смещение энергии пучка в периферийную зону. Приведенные выше графики численного моделирования демонстрируют этот факт.

3. Вычислительные эксперименты для среды с показателем преломления, распределенным по параболическому закону

Пусть показатель преломления зависит от координаты x следующим образом

$$n_0^2 = n_1^2 \left(1 - 2\Delta \left(\frac{x}{a} \right)^2 \right), \quad (8)$$

причем $n_{nl} = 0$.

Заметим [3], что при $x < a$

$$n_0 = n_1 \left(1 - \Delta \left(\frac{x}{a} \right)^2 \right) \quad (9)$$

Будем искать решение уравнения в виде

$$U(x, y, z) = A(z)B(x)C(y). \quad (10)$$

Подставляя (10) в уравнение (1), получаем факторизованное уравнение

$$\frac{2ik}{A} \cdot \frac{\partial A}{\partial z} = \frac{1}{n_0} \left(\frac{1}{B} \Lambda_x B + \frac{1}{C} \Lambda_y C \right) = -f, \quad (11)$$

где f - произвольная константа.

$$\text{Таким образом, } A(z) = K \exp\left(i \frac{f}{2k} z\right). \quad (12)$$

Преобразуя (11), получаем

$$\frac{1}{B} \Lambda_x B + fn_0 = -\frac{1}{C} \Lambda_y C = g^2, \quad (13)$$

где g^2 - произвольная константа.

С учетом (13)

$$C = \sin(yg). \quad (14)$$

Представим $B(x)$ в виде произведения двух функций

$$B(x) = X(x) \exp\left(-\frac{x^2}{\omega_0^2}\right). \quad (15)$$

После подстановки (15) и (9) в (13), и осуществив замену переменных, получаем

$$X(x) = H_N\left(\frac{x\sqrt{2}}{\omega_0}\right) \quad (16)$$

где H_N - многочлен Эрмита, причем

$$2N = (fn_1 - g^2) \frac{\omega_0^2}{2} - 1, \quad (17)$$

$$\omega_0^2 = \frac{2a}{\sqrt{fn_1\Delta}}. \quad (18)$$

Таким образом, с учетом (15), (14), (12) и (9) получаем искомое решение

$$U(x, y, z) = K \exp\left(i \frac{f}{2k} z\right) \sin(yg) H_N\left(\frac{x\sqrt{2}}{\omega_0}\right) \times \exp\left(-\frac{x^2}{\omega_0^2}\right). \quad (19)$$

3.1. Результаты численного решения линейного уравнения Шредингера

Для вычислительных экспериментов выберем, например, моду Гаусса-Эрмита с номером $N=11$.

Для выполнения граничного условия необходимо, чтобы $H_N\left(\frac{\pm L_x \sqrt{2}}{\omega_0}\right) = 0$. Пусть, например,

$$\frac{\pm L_x \sqrt{2}}{\omega_0} = \pm 12, \quad (20)$$

так как $H_N(\pm 12) \approx \pm 10^{-16}$.

Для выполнения граничного условия при $y=L_y$ получаем

$$g = \frac{\pi}{L_y}. \quad (21)$$

Из (17) и (18) можно найти f и $p = \frac{\Delta}{a^2}$

На рис. 12 изображено распределение интенсивности в пучке, описываемом формулой (19).

На рис. 13 - 14 приведены результаты численного моделирования линейного уравнения со следующими параметрами:

$$R = 50 \text{ мкм};$$

$$\lambda = 0,63 \text{ мкм, причем } \lambda = 2\pi/k;$$

$$n_1 = 1.$$

Как видно из приведенных графиков, результат численного решения уравнения Шредингера практически полностью совпадает с результатом аналитического решения.

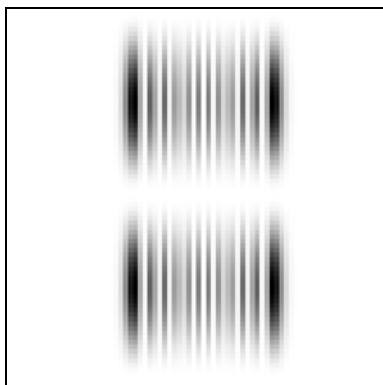


Рис. 12. Распределение интенсивности волны в линейной среде.

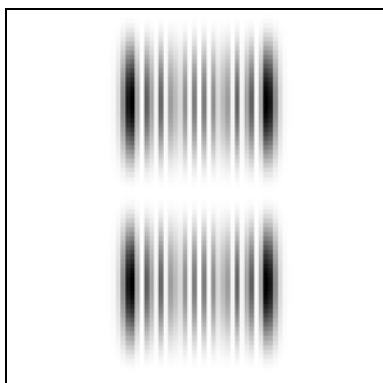


Рис. 13. Распределение интенсивности волны на расстоянии L от входа в среду ($L=1 \text{ мм}$, $n_z = 1000$, $n_x = 80$, $n_y = 80$).

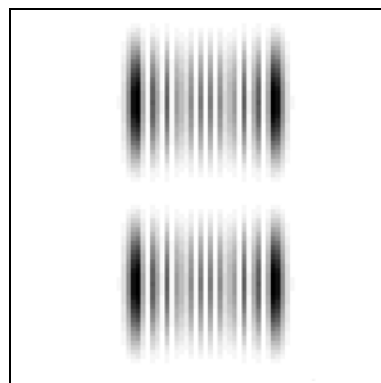


Рис. 14. Распределение интенсивности волны на расстоянии L от входа в среду ($L = 10 \text{ мм}$, $n_z = 50000$, $n_x = 80$, $n_y = 80$).

Заключение

Проведенные исследования подтвердили высокую точность численного решения задачи на расстояниях порядка миллиметра. Так для модели среды, не учитывающей эффект самовоздействия, численное решение практически совпадает с аналитическим, рассчитанным по формуле (7).

Для среды с “параболическим профилем” показателя преломления моды Гаусса-Эрмита, рассчитанные с помощью схемы (6), практически не претерпевают изменений в процессе распространения волны на расстояния порядка десятков миллиметров, что соответствует теории [3].

Для модели среды, учитывающей эффект самовоздействия, численный расчет позволяет наблюдать как явление самофокусировки излучения, так и его самодефокусировки, что спрогнозировано теоретическими оценками, например, в работе [1].

Литература

1. Виноградова М.Б., Руденко О.В., Сухориков А.П. Теория волн // М., Наука. 1979.
2. Самарский А.А. Теория разностных схем // М., Наука. 1977.
3. Адамс М. Введение в теорию оптических волноводов // М., Мир. 1984.

Numerical solution of the nonlinear Schrödinger equation in a Cartesian coordinate system

A.A. Degtyarev, A.E. Derkach
Samara State Aerospace University

Abstract

To solve the Schrödinger equation describing the propagation of an electromagnetic wave in a nonlinear medium, the authors develop a Peaceman-Rachford difference scheme with the iterative improvement, which has a quadratic order of accuracy regarding all three spatial variables. Particular cases of the problem providing for the analytical solution are considered to investigate the scheme. The analytical and numerical solutions are compared. The results of numerical simulation of the process of propagation of an electromagnetic wave in a nonlinear medium are presented, which allow to observe both the phenomena of self-focusing and self-defocusing of a light beam, which is fully consistent with the theory of electromagnetic waves [1]. The authors emphasize the possibility of using a difference scheme to analyze the processes of propagation of an electromagnetic wave in media with a spatially dependent refractive index.

Citation: Degtyarev AA, Derkach AE. Numerical solution of the nonlinear Schrödinger equation in a Cartesian coordinate system. *Computer Optics* 2001; 21: 9-13.

References

- [1] Vinogradova MB, Rudenko OV, Sukhorukov AP. Theory of waves [In Russian]. Moscow: "Nauka" Publisher; 1979.
- [2] Samarskii AA. The theory of difference schemes. CRC Press; 2001.
- [3] Adams MJ. An introduction to optical waveguides. New York: John Wiley & Sons Inc; 1981.